



TITLE:

# 電池材料のラマンスペクトルの計算

AUTHOR(S):

山中, 俊朗

---

CITATION:

山中, 俊朗. 電池材料のラマンスペクトルの計算. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2019, 2018: 70-70

ISSUE DATE:

2019-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/241196>

RIGHT:

電池材料のラマンスペクトルの計算  
Simulation of Raman spectrum of battery materials

京都大学 産官学連携本部 山中俊朗

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムの CASTEP を利用し、 $\text{LaF}_3$  のラマンスペクトル中のピークについて、対応する振動モードの原子の動きを調べた。

計算結果(図 b,c)が実験結果(図 a)を非常によく再現している。ピーク A に対応する原子の動きを図 d に示す。このモードでは主に層間のフッ素(F1)が層に垂直方向((001)方向)に振動することがわかった。ピーク B に対応する原子の動きを図 e に示す。このモードでは主に層内のフッ素(F2、F3)が層に並行方向に振動することがわかった。 $\text{LaF}_3$  の(001)面からフッ素を電気化学的に脱離させるとピーク A の強度が減少した。計算結果から、(001)方向に振動する F1 が(001)面から脱離したことがわかった。

$100\text{cm}^{-1}$  以下の遅い振動は La の振動であることもわかった。

発表論文(謝辞あり) Toshiro Yamanaka, Hirofumi Nakamoto, Takeshi Abe, Koji Nishio, Zempachi Ogumi, “Formation and Propagation of Fluorine-Deficient Phases in Large  $\text{LaF}_3$  Single Crystals during Electrochemical Defluorination”, ACS Applied Energy Materials (2019) in press

発表論文(謝辞なし) なし

